

学校编码: 10384

密级_____

学号: 20720091150037

厦门大学

硕士学位论文

部分 Ti 基合金体系扩散动力学数据库的建立

Development of Diffusion Kinetic Database of Some
Titanium-based Alloys

庄翠萍

指导教师姓名: 王翠萍教授

专业名称: 材料物理与化学

论文提交日期: 2012 年 5 月

论文答辩日期: 2012 年 6 月

2012 年 6 月

厦门大学学位论文原创性声明

本人呈交的学位论文是本人在导师指导下,独立完成的研究成果。本人在论文写作中参考其他个人或集体已经发表的研究成果,均在文中以适当方式明确标明,并符合法律规范和《厦门大学研究生学术活动规范(试行)》。

另外,该学位论文为()课题(组)的研究成果,获得()课题(组)经费或实验室的资助,在()实验室完成。(请在以上括号内填写课题或课题组负责人或实验室名称,未有此项声明内容的,可以不作特别声明。)

声明人(签名):

年 月 日

厦门大学学位论文著作权使用声明

本人同意厦门大学根据《中华人民共和国学位条例暂行实施办法》等规定保留和使用此学位论文，并向主管部门或其指定机构送交学位论文（包括纸质版和电子版），允许学位论文进入厦门大学图书馆及其数据库被查阅、借阅。本人同意厦门大学将学位论文加入全国博士、硕士学位论文共建单位数据库进行检索，将学位论文的标题和摘要汇编出版，采用影印、缩印或者其它方式合理复制学位论文。

本学位论文属于：

（ ） 1. 经厦门大学保密委员会审查核定的保密学位论文，
于 年 月 日解密，解密后适用上述授权。

（ ） 2. 不保密，适用上述授权。

（请在以上相应括号内打“√”或填上相应内容。保密学位论文应是已经厦门大学保密委员会审定过的学位论文，未经厦门大学保密委员会审定的学位论文均为公开学位论文。此声明栏不填写的，默认为公开学位论文，均适用上述授权。）

声明人（签名）：

年 月

摘 要

钛基合金具有密度小、强度高、导热系数小、耐热性好、耐腐蚀、无毒、无磁性等特点，在机械、医学、航空、航天、电子等工业领域中得到了广泛的应用。扩散动力学是材料设计领域中的重要理论基础，是研究扩散型相变和模拟材料工艺过程的有力工具，并且在 ε 相不锈钢的沉积、硬质合金的梯度烧结、合金的瞬时液相焊接、基底和合金的界面反应、模拟与扩散有关的非平衡凝固、扩散偶反应以及金属间化合物的生长等实际应用方面都有着重要意义。因此，开展钛基合金体系扩散动力学的计算，并建立钛基合金动力学数据库，将是一项具有重要理论价值和实际意义的研究工作。本论文主要通过模拟计算和实验数据对比两种途径，对钛基合金体系的扩散动力学进行了研究，所取得的主要研究成果如下：

(1) 利用 DICTRA 软件，根据文献报道的数据和第一性原理计算的晶格常数，对纯组元 La, Ir, Ce, Pb, Pd, Co, Au, Ag, Ni, Cu, Al, Fe, Pt, Ta, Ti, U, Cr, Li, Mo, Nb, Pr, Pu, Zr, Yb, W, K, Tl, Eu, Gd 在其稳定结构和亚稳结构中的自扩散系数进行了优化与计算，初步建立了纯组元自扩散动力学数据库。

(2) 利用 DICTRA 软件，根据文献报道的实验数据和优化得到的动力学参数，对钛基合金在 FCC、BCC 结构中的扩散系数进行了优化与计算，从而建立了 Ti-X (X= Ni, Cu, Ga, Mo, In, Ta, Si, V, Ag, Au, Pd, Cr, Zr, Fe, Sn, Nb)合金的动力学数据库。

(3) 利用 DICTRA 软件，根据文献报道的实验数据和优化得到的动力学参数，对部分三元合金的扩散动力学进行了优化与计算，计算的结果与实验数据取得了良好的一致性。

Ti 基合金动力学数据库所含信息量巨大，利用该数据库可以计算稳态与亚稳态下的扩散系数、扩散偶在界面反应时的界面移动情况、扩散偶浓度曲线、扩散路径等。该数据库对 Ti 基合金的设计具有重要的指导作用。

关键词： 钛基合金 DICTRA 扩散 动力学

Abstract

Titanium-based alloys are widely used in the industrial field of machinery, medical, aviation, aerospace and electronics due to their low density, high strength, thermal conductivity, good heat resistance, corrosion resistance, non-toxic and non-magnetic characteristics. Diffusion kinetic is an important theoretical basis of materials design, and it is a powerful tool to research the diffusion phase transformation and simulate the material. The diffusion kinetic is widely used in the deposition in ϵ phase of the stainless steel, the gradient sintering of cemented alloys, the transient liquid phase soldering in the alloys, the interfacial reaction of the substrate and the alloys, the simulation and the diffusion of non-equilibrium solidification, the reaction of the diffusion couples and the growth of the intermetallic. Therefore, to carry out the calculation of diffusion kinetics of titanium-based alloys, and the establishment of the kinetic database of the titanium-based alloys, will be an important theoretical value and economic value of research. In the present work, the comparison with experimental data and the diffusion kinetic assessment in titanium-based alloys were carried out. Major research contents are listed as follows:

(1) The self-diffusion coefficients of the pure elements in their stable structures are optimized in the frame of DICTRA according to the data reported in the literature. At the same time, based on the lattice calculated by the first principles, the self-diffusion coefficients of the pure elements in their metastable structures are optimized, and establish the diffusion dynamics of the pure elements database.

(2) According to the experimental data and the kinetic parameters obtained in (1), this work is to assess the diffusion dynamics of titanium-based alloys in the FCC, BCC structure, the results are good agreement with the experiments. Consequently, we establish the diffusion kinetic database of the titanium-based alloys of Ti-X (X=Ni, Cu, Ga, Mo, In, Ta, Cu, Si, V, Ag, Au, Pd, Cr, Zr, Fe, Sn, Nb).

(3) According to the experimental data and the kinetic parameters obtained, the

present work is to optimize the diffusion kinetic of the part of the ternary alloys and to establish the ternary alloy kinetic database. The calculated results agree well with the experimental data.

The kinetic database of titanium-based alloys includes huge information. The diffusion coefficients in the stable and metastable phase, the reaction of the diffusion couples, the diffusion paths all can be calculated based on the database. The kinetic database of titanium-based alloys can provide important theoretic evidence for design of titanium-based alloys.

Keywords: Titanium-based alloys; DICTRA; Diffusion; Kinetic

目 录

中文摘要.....	I
英文摘要.....	II
第一章 绪论.....	1
1.1 引言.....	1
1.2 钛及钛合金.....	1
1.2.1 钛合金的分类.....	1
1.2.2 钛中合金元素的分类与作用.....	3
1.2.3 钛基合金的特点.....	5
1.2.4 钛基合金的应用.....	7
1.2.5 钛基合金的发展前景.....	10
1.3 动力学研究现状.....	10
1.4 本研究的选题意义及其主要内容.....	11
参考文献.....	13
第二章 动力学模型和 Dictra 动力学计算.....	17
2.1 扩散通量的计算.....	17
2.2 纯组元在稳定结构中的自扩散与杂质扩散系数的优化.....	18
2.3 纯组元在亚稳结构中的自扩散系数的计算.....	19
2.4 固溶体相动力学参数的优化.....	20
2.5 DICTRA 动力学计算.....	20
参考文献.....	22
第三章 纯组元自扩散动力学数据库的建立.....	23
3.1 引言.....	23
3.2 纯组元在 FCC 结构中自扩散系数的优化与计算.....	24
3.2.1 纯组元 La.....	24
3.2.2 纯组元 Ir.....	24

3.2.3 纯组元 Ce.....	24
3.2.4 纯组元 Pb.....	24
3.2.5 纯组元 Pd.....	25
3.2.6 纯组元 Co.....	25
3.2.7 纯组元 Au.....	25
3.2.8 纯组元 Ag.....	26
3.2.9 纯组元 Ni.....	26
3.2.10 纯组元 Cu.....	27
3.2.11 纯组元 Al.....	27
3.2.12 纯组元 Fe.....	28
3.2.13 纯组元 Pt.....	28
3.3 纯组元在 BCC 结构中自扩散系数的优化与计算.....	36
3.3.1 纯组元 Ta.....	36
3.3.2 纯组元 Ti.....	36
3.3.3 纯组元 U.....	36
3.3.4 纯组元 Ce.....	37
3.3.5 纯组元 Cr.....	37
3.3.6 纯组元 La.....	37
3.3.7 纯组元 Li.....	38
3.3.8 纯组元 Mo.....	38
3.3.9 纯组元 Nb.....	38
3.3.10 纯组元 Pr.....	39
3.3.11 纯组元 Pu.....	39
3.3.12 纯组元 Zr.....	39
3.3.13 纯组元 Yb.....	40
3.3.14 纯组元 W.....	40
3.3.15 纯组元 K.....	40
3.3.16 纯组元 Tl.....	41
3.3.17 纯组元 Eu.....	41

3.3.18 纯组元 Gd.....	41
3.4 小结.....	52
参考文献.....	53
第四章 Ti-X 二元系合金扩散动力学的优化与计算.....	59
4.1 引言.....	59
4.2 Ti-X 二元合金在 FCC 结构中扩散动力学的优化与计算.....	59
4.2.1 Ti-Ni 二元系.....	59
4.2.2 Ti-Cu 二元系.....	60
4.3 Ti-X 二元合金在 BCC 结构中扩散动力学的优化与计算.....	65
4.3.1 Ti-Ga 二元系.....	65
4.3.2 Ti-Mo 二元系.....	65
4.3.3 Ti-In 二元系.....	66
4.3.4 Ti-Ta 二元系.....	66
4.3.5 Ti-Cu 二元系.....	67
4.3.6 Ti-Si 二元系.....	67
4.3.7 Ti-V 二元系.....	68
4.3.8 Ti-Ag 二元系.....	68
4.3.9 Ti-Au 二元系.....	69
4.3.10 Ti-Pd 二元系.....	69
4.3.11 Ti-Cr 二元系.....	69
4.3.12 Ti-Zr 二元系.....	70
4.3.13 Ti-Fe 二元系.....	71
4.3.14 Ti-Sn 二元系.....	72
4.3.15 Ti-Nb 二元系.....	72
4.4 小结.....	103
参考文献.....	104
第五章 部分三元合金扩散动力学的优化与计算.....	106
5.1 引言.....	106
5.2 Al-Ag-Zn 三元系.....	106

5.2.1 基础二元系.....	106
5.2.2 计算与结果讨论.....	106
5.3 Cu-Ni-Sn 三元系.....	122
5.3.1 基础二元系.....	122
5.3.2 计算与结果讨论.....	122
5.4 Cu-Zn-Sn 三元系.....	126
5.4.1 基础二元系.....	126
5.4.2 计算与结果讨论.....	126
5.5 Ti-Al-Nb-Zr-Ta-W-V-Ag-Sn-Ni 动力学数据库的建立及其应用探索.....	128
5.5.1 Ti-Al-Nb-Zr-Ta-W-V-Ag-Sn-Ni 动力学数据库的建立.....	128
5.5.2 扩散偶成分曲线的计算预测.....	128
5.5.3 扩散路径的计算预测.....	129
5.6 小结.....	135
参考文献.....	136
第六章 总结.....	138

CONTENTS

Abstract in Chinese.....	I
Abstract in English.....	II
Chapter 1 Introduction.....	1
1.1 Introduction.....	1
1.2 Titanium and titanium-based alloys.....	1
1.2.1 Classification of titanium-based alloys.....	1
1.2.2 Classification and function of alloying elements.....	3
1.2.3 Performance of titanium-based alloys.....	5
1.2.4 Application of titanium-based alloys.....	7
1.2.5 Development of titanium-based alloys.....	10
1.3 Development of the kinetic.....	10
1.4 Significance and major contents of this work.....	11
References.....	13
Chapter 2 Kinetic models and kinetic optimization.....	17
2.1 Calculation of diffusion flux.....	17
2.2 Optimization of self-diffusion and impurity diffusion for pure elements in stable structures.....	18
2.3 Calculation of self-diffusion for pure elements in metastable structures... 	19
2.4 Optimization of kinetic parameters of solid solution.....	20
2.5 Kinetic optimization.....	20
References.....	22
Chapter 3 Development of self-diffusion kinetic database for pure elements.....	23
3.1 Introduction.....	23
3.2 Optimization of self-diffusion for pure elements in FCC structure.....	24

3.2.1 Pure element La.	24
3.2.2 Pure element Ir.	24
3.2.3 Pure element Ce.	24
3.2.4 Pure element Pb.	24
3.2.5 Pure element Pd.	25
3.2.6 Pure element Co.	25
3.2.7 Pure element Au.	25
3.2.8 Pure element Ag.	26
3.2.9 Pure element Ni.	26
3.2.10 Pure element Cu.	27
3.2.11 Pure element Al.	27
3.2.12 Pure element Fe.	28
3.2.13 Pure element Pt.	28
3.3 Optimization of self-diffusion for pure elements in BCC structure.	36
3.3.1 Pure element Ta.	36
3.3.2 Pure element Ti.	36
3.3.3 Pure element U.	36
3.3.4 Pure element Ce.	37
3.3.5 Pure element Cr.	37
3.3.6 Pure element La.	37
3.3.7 Pure element Li.	38
3.3.8 Pure element Mo.	38
3.3.9 Pure element Nb.	38
3.3.10 Pure element Pr.	39
3.3.11 Pure element Pu.	39
3.3.12 Pure element Zr.	39
3.3.13 Pure element Yb.	40
3.3.14 Pure element W.	40
3.3.15 Pure element K.	40

3.3.16 Pure element Tl.....	41
3.3.17 Pure element Eu.....	41
3.3.18 Pure element Gd.....	41
3.4 Summary.....	52
References.....	53
Chapter 4 Optimization of diffusion kinetic for titanium-based alloys.....	59
4.1 Introduction.....	59
4.2 Optimization of diffusion kinetic for titanium-based alloys in FCC structure.....	59
4.2.1 Ti-Ni binary system.....	59
4.2.2 Ti-Cu binary system.....	60
4.3 Optimization of diffusion kinetic for titanium-based alloys in BCC structure.....	65
4.3.1 Ti-Ga binary system.....	65
4.3.2 Ti-Mo binary system.....	65
4.3.3 Ti-In binary system.....	66
4.3.4 Ti-Ta binary system.....	66
4.3.5 Ti-Cu binary system.....	67
4.3.6 Ti-Si binary system.....	67
4.3.7 Ti-V binary system.....	68
4.3.8 Ti-Ag binary system.....	68
4.3.9 Ti-Au binary system.....	69
4.3.10 Ti-Pd binary system.....	69
4.3.11 Ti-Cr binary system.....	69
4.3.12 Ti-Zr binary system.....	70
4.3.13 Ti-Fe binary system.....	71
4.3.14 Ti-Sn binary system.....	72
4.3.15 Ti-Nb binary system.....	72

4.4 Summary	103
References	104
Chapter 5 Optimization of diffusion kinetic for some ternary alloys	106
5.1 Introduction	106
5.2 Al-Ag-Zn ternary system	106
5.2.1 Basic binary system.....	106
5.2.2 Optimization and discussion.....	106
5.3 Cu-Ni-Sn ternary system	122
5.3.1 Basic binary system.....	122
5.3.2 Optimization and discussion.....	122
5.4 Cu-Zn-Sn ternary system	126
5.4.1 Basic binary system.....	126
5.4.2 Optimization and discussion.....	126
5.5 Application of Ti-Al-Nb-Zr-Ta-W-V-Ag-Sn-Ni database	128
5.5.1 Development of Ti-Al-Nb-Zr-Ta-W-V-Ag-Sn-Ni kinetic database.....	128
5.5.2 Simulation of diffusion couple.....	128
5.5.3 Simulation of diffusion paths.....	129
5.6 Summary	135
References	136
Chapter 6 Conclusions	138

第一章 绪论

1.1 引言

现代科学技术的进步使高新技术领域得到快速的发展,新材料作为高新技术的基础和先导,如雨后春笋般涌现出来。而新材料的诞生往往又会使产业和社会发生巨大变革。钛及钛合金由于比强度高和抗腐蚀性能优异而表现突出,且密度仅为钢和镍基合金的一半左右,因此具有巨大的发展潜力和广阔的应用前景,同时也促使世界各国研究者越来越重视对其的研究开发与推广应用。从1948年美国首次将钛投入工业化生产半个多世纪以来,钛的应用在几十个行业中取得了迅速的发展,应用的同时也收到了显著的经济效益和社会效益,并成为宇航、海洋、化学和石油化工工业必不可少的工程材料。随着我国国民经济的持续、快速发展,对钛材的需求量也迅速增长。我国从20世纪60年代开始,经历了从仿制到创新的漫长过程,进行了大量的研究开发工作。到目前为止,我国工业化生产的钛合金已有几十个牌号,并已经广泛地应用于不同领域。

1.2 钛及钛合金

1.2.1 钛合金的分类

钛合金一般是按其组织来命名的,即 α 钛合金、 β 钛合金及 $\alpha+\beta$ 钛合金。中国国家标准中分别用TA、TB、TC作为字头表示钛合金的类型,其后跟着一个数字代表合金的序号,如TA表示 α 钛合金,TA7为Ti-5Al-2.5Sn合金。它们的分类可以借用Ti-X合金部分相图加以说明(如图1.2-1)。如果钛中X的加入量少于D点的含量时,从 β 相变温度以上的温度空冷,此时合金将形成条状的 α 相组织,称其为 α 钛合金;如果钛中加入的X大于B,在淬火冷却或空气冷却时将得到单一且不稳定的 β 相组织,称其为 β 钛合金;而如果加的X含量在D点到B点之间,此时合金将呈现 $\alpha+\beta$ 双相组织,称其为 $\alpha+\beta$ 钛合金。

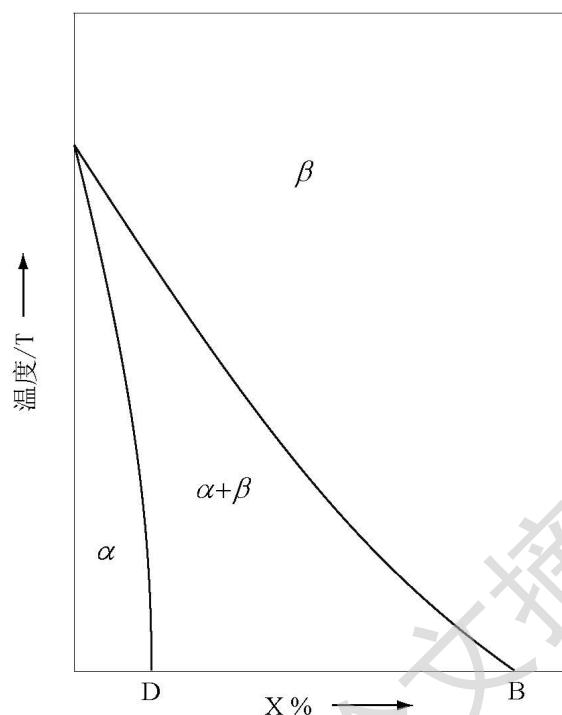


图1.2-1 钛合金分类说明

Fig. 1.2-1 Classification of titanium alloys

(1) α 钛合金

主要含有 α 稳定化元素,在室温稳定状态下基本为 α 相的钛合金,如工业纯钛。其主要特点是高温性能好、组织稳定、焊接性和热稳定性好。 α 钛合金主要应用于化工、石化和加工工业,在这些工业中主要考虑的是合金的耐腐蚀性能和可加工变形能力。

(2) β 钛合金

这类钛合金中含有足够多的 β 稳定化元素,在适当冷却速度下室温组织全部为 β 相。 β 钛合金的塑性加工性能好,可通过强化热处理获得高的常温力学性能。

(3) $\alpha+\beta$ 钛合金

含有较多的 β 稳定化元素,在室温稳定状态下,由 α 及 β 相所组成的钛合金。 β 含量一般为10~15%。这类合金有较好的综合力学性能、强度高、可热处理强化、热压力加工性好、在中等温度下耐热性也比较好的,但组织不够稳定。

由此可见, α 、 $\alpha+\beta$ 和 β 钛合金,各有各的优缺点。表1.1是这三类钛合金的性能比较。对于本研究中的 β 钛合金,其比强度比较高,这可以有效减小航天航空中飞行器的重量。更为重要的是这类钛合金具有优异的冷成型能力,这对于

Degree papers are in the "[Xiamen University Electronic Theses and Dissertations Database](#)". Full texts are available in the following ways:

1. If your library is a CALIS member libraries, please log on <http://etd.calis.edu.cn/> and submit requests online, or consult the interlibrary loan department in your library.
2. For users of non-CALIS member libraries, please mail to etd@xmu.edu.cn for delivery details.

厦门大学博硕士论文摘要库